

FORSCHUNGSZENTRUM JÜLICH GmbH
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik
D-52425 Jülich, Tel. (02461) 61-6402

Interner Bericht

**Hochauflösende Modellierung
von SOFC-Brennstoffzellen
– Statusbericht –**

Christof Schelthoff, Bernhard Steffen

KFA-ZAM-IB-9521

September 1995
(Stand 22.09.95)

Forschungszentrum Jülich GmbH
Zentralinstitut für Angewandte Mathematik

BMBF-Projekte im ZAM

**Hochauflösende Modellierung
von SOFC-Brennstoffzellen**

– Statusbericht –

Christof Schelthoff
Bernhard Steffen

Jülich, 22. September 1995

Kurzfassung

Im Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM) werden zur Zeit mehrere vom BMBF geförderte Projekte durchgeführt. Eines dieser Projekte aus dem Verbund *Anwendungsorientierte Mathematik* beschäftigt sich mit der Modellierung von Hochtemperatur-Brennstoffzellen mit Feststoffelektrolyten (SOFC).

Die BMBF-Projekte dienen der verstärkten Zusammenarbeit zwischen Forschung und Industrie. In diesem Projekt findet diese Zusammenarbeit über das Institut für Energieverfahrenstechnik (IEV) mit verschiedenen Brennstoffzellenherstellern, z.B. Siemens und Daimler-Benz, statt, die geeignete Kennlinien und Tabellen zur Beschreibung wichtiger Parameter liefern.

Dieser Bericht über das laufende Projekt soll einen allgemeinen Einblick über die Funktion der Brennstoffzelle geben und die auftretenden Aufgabenstellungen des wissenschaftlichen Rechnens beschreiben.

Zunächst werden die zum großen Teil fertiggestellten Module zur Geometriedefinition und Diskretisierung vorgestellt und die kontinuierlichen und diskreten Gleichungen hergeleitet. Der letzte und von der Mathematik her anspruchsvollste Teil – die numerische Lösung der nichtlinearen gekoppelten Gleichungen – befindet sich derzeit im Aufbau, so daß hierzu noch keine Ergebnisse vorgelegt werden können. Als Lösungsverfahren wird derzeit ein Mehrgitterverfahren implementiert.

Im Kapitel Mehrgitterverfahren wird nicht auf die Besonderheiten in der vorliegenden Modellierung eingegangen, sondern diese Technik in allgemeiner Form erklärt. Dieses soll dazu dienen auch denjenigen, die mit der numerischen Mathematik nicht so vertraut sind, einen Einblick in dieses aktuelle und in letzter Zeit häufig verwendete Verfahren zu geben und die dort zu behandelnden Probleme und Prinzipien zu verstehen.

Inhaltsverzeichnis

1	Die Hochtemperaturbrennstoffzelle	1
1.1	Einleitung	1
1.2	Historie	3
1.3	Arbeitsprinzip der Brennstoffzelle	5
1.4	Modellierungsebenen	7
1.5	Chemie der Brennstoffzelle	8
1.6	Geometrie der Zelle	9
2	Scientific Computing	13
3	Physikalische Beschreibung	17
3.1	Erhaltungssätze	17
3.2	Randbedingungen und weitere Gleichungen	20
3.3	Diskretisierung der Gleichungen	21
3.3.1	Stromfluß	23
3.3.2	Wärme flu ß	24
3.3.3	Massen flu ß	25
3.4	Gültigkeitsbereich der Gleichungen	26
4	Gittererzeugung	27
4.1	Allgemeines	27
4.2	Geometrie eingabe	28
4.3	Diskretisierung der Geometrie	28
4.4	Gitterverfeinerung	29
4.5	Speicherbedarf	30

5	Mehrgitterverfahren	35
5.1	Einführung	35
5.2	Idee der Mehrgitterverfahren	36
5.3	Notation und Definitionen	37
5.4	Grobgitterkorrektur	38
5.5	Glättung	39
5.6	Der V-Cycle	42
5.7	Full Multigrid	43
5.8	Restringierung und Prolongation	44
6	Stand der Arbeiten und Ausblick	47
	Literaturverzeichnis	49

Abbildungsverzeichnis

1.1	Autonome Energieversorgung	2
1.2	Umwandlung von chemischer in elektrische Energie	5
1.3	Vergleich von direkter, ionen- und elektronenleitender und nur ionenleitender Verbindung	6
1.4	Die Grenzschicht Elektroden/Elektrolyt der Brennstoffzelle . .	9
1.5	Die Brennstoffzelle in Plattenbauweise	10
2.1	Entwicklung der Hardware	14
2.2	Entwicklung der mathematischen Verfahren zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen anhand eines Modell- problems	15
2.3	Modellierung der Brennstoffzelle als Beispiel für das Scientific Computing	16
3.1	Spannung U in Abhängigkeit von der Zellhöhe y an der Grenz- schicht Kathode-Elektrolyt	21
3.2	Diskretisierung mit Hilfe eines dualen Gitters	22
4.1	Verfeinerung einer Viereckszelle	30
4.2	Verfeinerung einer Dreieckszelle	31
4.3	Gitterverfeinerung beim gemischten Gitter	32
5.1	Die Grobgitterkorrektur	39
5.2	Für grobe und feine Gitter sichtbare Fourier-Moden	40
5.3	Verlauf des Fehlers	40
5.4	Reduktion des Fehlers durch das Gauß-Seidel-Verfahren für die Laplace-Gleichung auf dem Einheitsquadrat	41
5.5	V-Zyklus	43

5.6	Full Multigrid	44
-----	--------------------------	----

Kapitel 1

Die Hochtemperaturbrennstoffzelle

Ziel dieses Kapitels ist es, einen Einblick in die Anwendung und Funktionsweise der Brennstoffzelle zu geben. Neben einer kurzen Betrachtung der historischen Entwicklung soll insbesondere der stromerzeugende Prozeß erklärt werden.

1.1 Einleitung

Eine der wichtigsten Herausforderungen an das nächste Jahrtausend ist die Deckung des Energiebedarfs. Entscheidend sind die Aspekte Umweltverträglichkeit, Dezentralisierung, Sicherheit und kontinuierliche Präsenz der Energie.

Konventionelle Verbrennungsprozesse zur Stromerzeugung haben zum einen einen sehr niedrigen Wirkungsgrad – zwischen 30 und 40 Prozent – zum anderen verursachen sie sehr ernst zu nehmende Umweltbelastungen wie den Treibhauseffekt und den sauren Regen. Weiterhin ist der nur begrenzte Vorrat an fossilen Energieträgern ein Argument, das zum baldigen Handeln zwingt.

Solar- und Windenergie sind sicherlich die Basis für zukünftige Energiegewinnungsformen. Eines der wesentlichen Probleme ist die Präsenz dieser Energieformen. Das schwankende Angebot der erneuerbaren Energien und die ebenfalls schwankende Nachfrage führen auf das Problem einer effizienten Energiespeicherung, wobei sowohl kurzfristig kleine Energiemengen als

auch langfristig (Winter) große Energiemengen gespeichert werden müssen. Die kurzfristige Bedarfsdeckung kann durch Batterien erfolgen, zur langfristigen Deckung ist die Brennstoffzelle ein angemessener Energieumwandler.

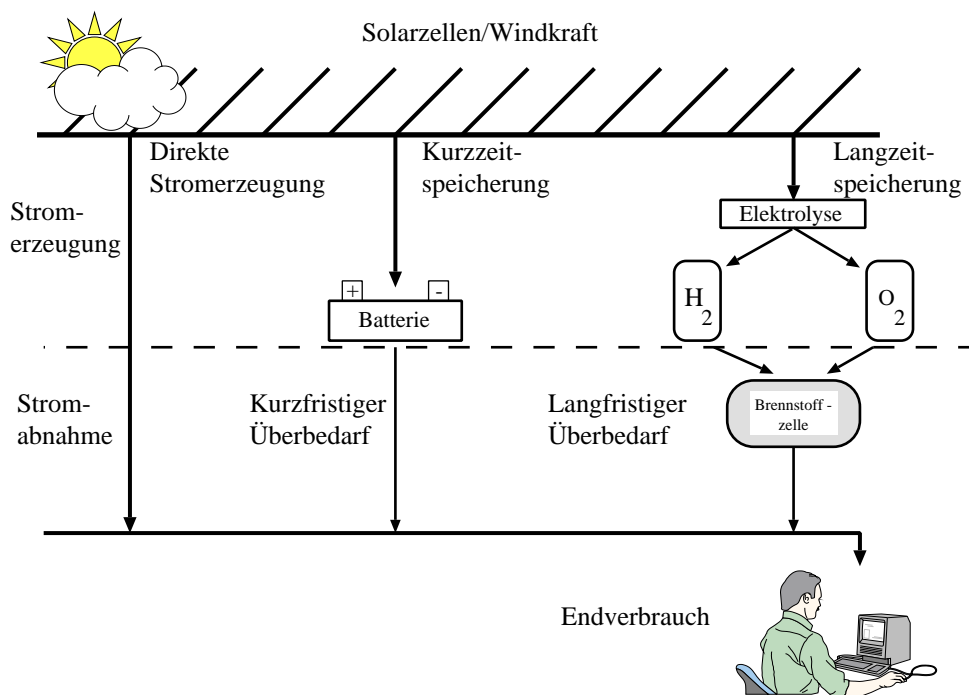


Abbildung 1.1: Autonome Energieversorgung

Abb. 1.1 zeigt schematisch die Energiespeicherung und Rückverstromung. Bei Energieüberangebot wird aus einem Wassertank Wasser entnommen und mittels Elektrolyse in Wasserstoff und Sauerstoff gespalten, welche dann beliebig lange gespeichert werden können. Ist Energiebedarf vorhanden, können Wasserstoff und Sauerstoff in einer Brennstoffzelle rückverstromt werden, wobei diese elektrochemische Energieumwandlung die Umkehrung der Elektrolyse ist. Da Wasserstoff und Sauerstoff die einzigen beteiligten Stoffe dieser Energieumwandlung sind, läuft der gesamte Vorgang frei von Schadstoffemissionen ab. Bei der Stromerzeugung entsteht als Reaktionsprodukt Wasser, welches sich wieder in den Wassertank einspeisen lässt, womit sich der

Kreislauf schließt.

Ein weiterer Vorteil liegt in der Modularität dieser Energiegewinnungsform. Sowohl Solarzellen als auch Brennstoffzellen lassen sich durch serielle und parallele Schaltung im Baukastensystem zu variablen Leistungsgrößen verschalten. Somit können sogenannte Inselsysteme, also autonome Energieerzeugungsstätten, beliebiger Größe erzeugt werden.

Unabhängig von einer vorgeschalteten Elektrolyse kann die Brennstoffzelle wegen ihrer einfachen Skalierbarkeit in den unterschiedlichsten Bereichen eingesetzt werden. So ist an eine Verwendung im PKW genauso gedacht wie als Stromversorger für den Privat-Haushalt bis hin zum Großkraftwerk.

Es besteht derzeit großes Interesse daran, als Energieumwandler für fossile Brennstoffe statt der derzeit verwendeten Wärmekraftwerke die Brennstoffzelle einzusetzen und somit die dort anfallenden Schadstoffemissionen weitgehend zu verhindern. Neben der geringen Schadstoff- und Geräuschbelastung und der einfachen Prozeßführung ist auch der hohe Wirkungsgrad eine Stärke der Brennstoffzelle.

Unterschieden werden die Brennstoffzellen nach ihrer Betriebstemperatur, verwendetem Elektrolyten und Brennstoff. Eine Übersicht über die derzeit verwendeten Typen ist in Tab. 1.1 gegeben. Die Abkürzung BZ steht dort für Brennstoffzelle. Als Brennstoff kann in allen Zellen Wasserstoff eingesetzt werden und außer bei der AFC – evtl. reformiertes – Methan. Die SOFC läßt zusätzlich den Einsatz von Kohlegas zu.

Wegen ihrer Betriebstemperatur werden die MCFC und SOFC als Hochtemperatur-Brennstoffzellen, die anderen als Niedertemperatur-Brennstoffzellen bezeichnet. Die Niedertemperatur-Brennstoffzellen sind weitgehend aus dem Entwicklungsstadium heraus, während die Hochtemperatur-Brennstoffzellen derzeit nur in einigen Prototyp-Versionen mit kleiner Leistung hergestellt werden.

1.2 Historie

Die Entdeckung des Brennstoffzellenprinzips gelang dem englischen Physiker Sir William Grove (1811 - 1896) im Jahre 1839. Er beheizte Wasserdampf mit einem Platindraht, worauf der Wasserdampf in Wasser- und Sauerstoff zerfiel. Diesen Vorgang der thermischen Dissoziation von Molekülen wies er als kalte Verbrennung nach. Da dieser Vorgang reversibel ist, konnte die

Name und internationale Abkürzung	Temperatur in Grad Celsius	Elektrolyt	Wirkungsgrad in Prozent	Anwendung
Alkalische BZ (AFC)	80 bis 90	Kalilauge	50 bis 65	Raumfahrt, Schifffahrt, Transport
Polymer-Elektrolytmembran BZ (PEMFC)	80 bis 90	Polymermembran	50 bis 60	Raumfahrt, Schifffahrt, Transport, Elektroauto
Phosphorsaure BZ (PAFC)	200	Phosphorsäure	35 bis 45	Kraftwerk
Schmelzkarbonat BZ (MCFC)	650	Calciumcarbonat	45 bis 60	Kraftwerk
BZ mit Feststoffoxid-Elektrolyt (SOFC)	850 bis 1000	Zirkonoxid	50 bis 60	Kraftwerk

Tabelle 1.1: Brennstoffzellentypen

chemische Energie wieder direkt in elektrische umgewandelt werden.

Bereits Ende des 19. Jahrhunderts schien durch die elektrodynamischen Prinzipien von Werner von Siemens die elektrochemische Stromerzeugung überholt zu sein. Zwar gab es immer wieder Arbeiten zu diesem Themengebiet, wie z.B. von Walter Nernst, der sich mit der galvanischen Stromerzeugung befaßte und 1920 den Chemie-Nobelpreis erhielt, doch von technischer Bedeutung waren lediglich die Batterien.

Die erste Renaissance erlebte die Brennstoffzelle Mitte der 60er Jahre mit ihrem Einsatz in Unterseebooten und vor allem in der Raumfahrt. Bei ihrem ersten Einsatz 1963 in den Gemini-Missionen wurden mit Brennstoffzellen über 10000 Betriebsstunden im Weltraum abgeleistet. Bei einem Wirkungsgrad von 60% lieferten die Zellen durch die Verbrennung von Sauerstoff und Wasserstoff zusätzlich als Reaktionsprodukt reines Wasser, welches zur Versorgung der Mannschaft aufbereitet wurde.

Die hohen Herstellungskosten, hohe Materialanforderungen und Verlustmechanismen führten jedoch dazu, daß im alltäglichen Gebrauch die Brenn-

stoffzelle kaum Anwendung fand. Aufgrund der stark gewachsenen Anforderungen bezüglich der Umweltverträglichkeit der Stromerzeugung findet derzeit eine zweite Renaissance statt. Es gilt nun, diese emissionsfreie Energiequelle, deren Betriebsführung bei niedrigen Temperaturen bereits gut beherrscht wird, bis hin zur Kraftwerksgröße auszubauen.

1.3 Arbeitsprinzip der Brennstoffzelle

Die konventionelle Umwandlung beruht auf dem Prinzip, zunächst Wärme zu erzeugen, die dann in mechanische und schließlich in elektrische Energie umgewandelt wird, wie in Abb. 1.2 dargestellt ist.

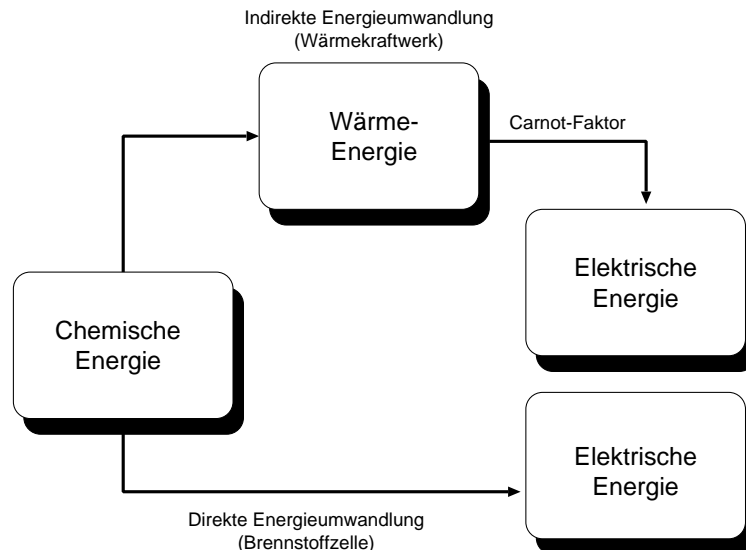


Abbildung 1.2: Umwandlung von chemischer in elektrische Energie

Die indirekte Stromerzeugung durchläuft dabei die stark verlustbehaftete Kette Wärme – Dampf – Turbine – Generator. Dabei wird der maximale Prozentsatz an Energieumwandlung, der Wirkungsgrad η_{max} , begrenzt durch den Carnot-Faktor

$$\eta_{max} = \frac{T_{in} - T_{out}}{T_{in}} \times 100 \ ,$$

wobei T_{in} und T_{out} Eingangs- und Ausgangstemperatur des Wärmeprozesses ist. Dieser maximale Wirkungsgrad gilt für alle Konvertoren, wie z.B. Dampfturbine oder Verbrennungsmotor, die mit einer Quellen- und Senktemperatur arbeiten. Die reale Ausbeute solcher Energiegewinnungssysteme liegt meist bei 30 bis 40 Prozent.

Die Brennstoffzelle hingegen wandelt chemische Energie direkt in elektrische um und ist somit nicht an den Carnot-Faktor gebunden. Wirkungsgrade sogar über 100% sind hier prinzipiell möglich [1], da das System auch der Umgebung entnommene Wärme in elektrische Energie umsetzen kann. Realistisch erscheinen derzeit Wirkungsgrade von bis zu 70%.

Dabei erzeugt die Brennstoffzelle ähnlich wie die Batterie Gleichstrom niedriger Spannung. Während bei der Batterie der energieerzeugende chemische Stoff enthalten ist – und somit auch irgendwann verbraucht ist – werden bei der Brennstoffzelle die Brennstoffe kontinuierlich zugeführt.

Grundlage der Stromerzeugung ist die hohe elektrochemische Aktivität von Wasserstoff und Sauerstoff.

Die verschiedenen Methoden Wasser- und Sauerstoff reagieren zu lassen, sind in Abb. 1.3 dargestellt.

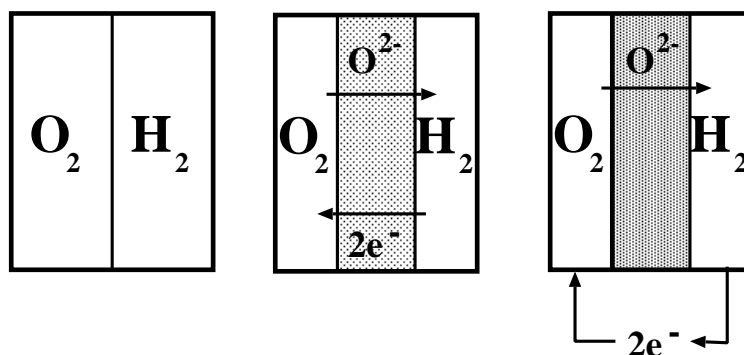


Abbildung 1.3: Vergleich von direkter, ionen- und elektronenleitender und nur ionenleitender Verbindung

Bringt man diese Stoffe zusammen, so ist eine heftige Reaktion, der Knallgaseffekt, zu beobachten. Findet der Austausch über ein ionen- und elektronenleitendes Medium statt, so entsteht durch die Enthalpiedifferenz Wärme.

Der Wasserstoff erhöht seine negative Ladung (Oxidation), während der Sauerstoff diese verringert (Reduktion). Da dieses aber völlig ungeordnet an einer Vielzahl von Teilchen passiert, läßt sich von außen kein Stromfluß feststellen.

Die Idee, die zur Stromerzeugung führt, ist recht einfach. Die Gase, und damit die ablaufenden Reaktionen, werden durch einen ionenleitenden Elektrolyten und Elektroden räumlich getrennt. Während diese Materialien weiterhin Ionen leiten, gilt dies für Elektronen nicht. Diese werden an den Elektroden aufgefangen und über eine angeschlossene Last, z.B. einen Motor, abgegriffen.

1.4 Modellierungsebenen

Modelliert wird in dieser Arbeit die Hochtemperatur-Brennstoffzelle mit Feststoffelektrolyt (SOFC) (engl. solid oxid fuel cell). Deshalb gelten die folgenden Betrachtungen meist nur für diesen Zelltyp.

Bei der Modellierung werden unterschiedliche Skalen betrachtet. Die kleinsten Skalen beschäftigen sich mit den Elektrodenmodellen. Diese liefern die Daten der Elektrochemie und sind wiederum Eingabe für die Zellmodellierung, welche in dieser Arbeit betrachtet wird. Die nächst höheren Ebenen sind die Zellstapelmodelle (Stackmodelle), die Kraftwerksmodelle bis hin zu weltweiten Energieszenarien. Das jeweilige Modell fließt üblicherweise hierbei in Form von Kennlinien oder Materialkonstanten in das nächst größere als Black Box ein. Langfristig wünschenswert wäre ein Modell, in dem alle Skalen betrachtet werden könnten, da diese Skalen untereinander eine starke Wechselwirkung in Bezug auf die Optimierung des Gesamtsystems haben. Inwieweit sich dies realisieren läßt, ist jedoch fraglich.

Hier wird, wie bereits erwähnt, die mittlere Ebene betrachtet, bei der Aussagen über den quantitativen Zusammenhang zwischen Brennstoffzusammensetzung, Temperaturen, Spannungen und Strömen für eine vorgegebene Zellgeometrie mit einer bekannten elektrochemischen Reaktion gemacht werden sollen.

1.5 Chemie der Brennstoffzelle

Da die Chemie Grundlage für die Stromerzeugung in der Brennstoffzelle ist und Konzentrationsänderungen durch diese Reaktionen hervorgerufen werden, ist eine Kenntnis der grundlegenden chemischen Vorgänge notwendig zur Modellierung der Zelle.

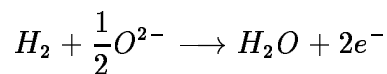
Im Prinzip läßt sich die Zelle mit beliebigen reaktionsfähigen Gasen betreiben; unter den zur Zeit realisierbaren Bedingungen ist die Oxidation von Wasserstoff die einzige, die praktikabel ist. Der Grund hierfür ist die hohe elektrochemische Aktivität des Wasserstoffes im Vergleich zu allen anderen Brennstoffen. Weiterhin liegt hier ein einfacher Reaktionsmechanismus vor bei dem keine hemmenden Nebenprodukte anfallen. Durch eine vorgeschaltete Reformierung ist alternativ eine Verwendung von Kohlenwasserstoffgemischen möglich. Bei Verwendung von Erdgas anstelle von reinem Wasserstoff läuft zusätzlich die Methanreformierungsreaktion ab. Im folgenden wird die Brennstoffzelle mit Wasserstoff als Brenngas betrachtet; Änderungen auf andere Gase sind im wesentlichen einfach zu realisieren.

Die Grenzschicht, an der die Elektrochemie stattfindet, ist in Abb. 1.4 dargestellt. Sie besteht aus der Brennstoffelektrode (Anode) und der Sauerstoffelektrode (Kathode), die durch einen ionenleitenden Elektrolyten miteinander verbunden sind. Außerhalb der Zelle wird eine externe Last, z.B. ein Elektromotor, angelegt um die Spannung abzugreifen.

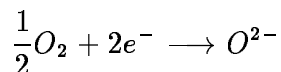
Der stromerzeugende Prozeß läuft an der Grenzschicht Elektroden – Elektrolyt ab. An der Anode oxidiert der Wasserstoff mit negativ geladenen Sauerstoffionen aus dem Elektrolyten. Dabei werden $2e^-$ frei. An der Kathode wird Luftsauerstoff mit $2e^-$ reduziert und durch den Elektrolyten zur Anode transportiert.

Die chemischen Reaktionen laufen wie folgt ab:

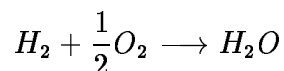
Anode



Kathode



Insgesamt führt dies zu der Brutto-Reaktion



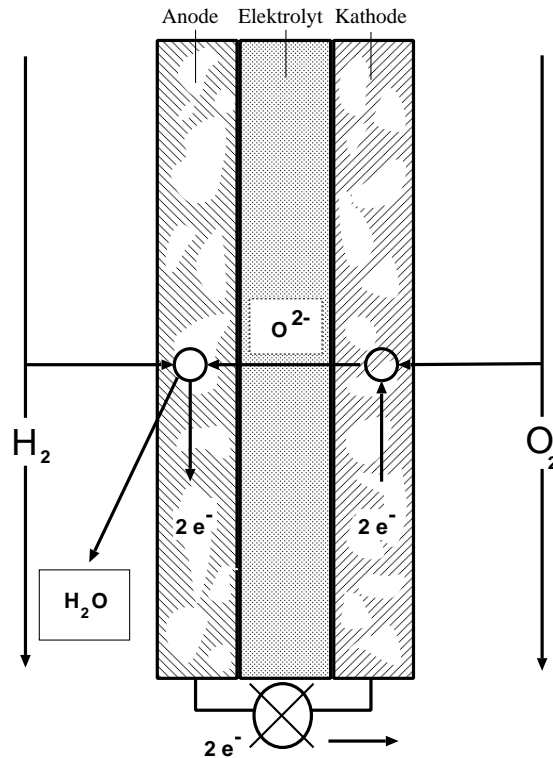


Abbildung 1.4: Die Grenzschicht Elektroden/Elektrolyt der Brennstoffzelle

Damit die Gasdurchlässigkeit der Elektroden gewährleistet ist, werden poröse Medien verwandt. Als Elektrolyt wird ein Feststoff betrachtet.

1.6 Geometrie der Zelle

Da die Konstruktion der Zelle, und somit auch die Suche nach der geeigneten Geometrie, noch in den Anfängen steckt, existiert eine Reihe von Vorschlägen für die Gestalt der Brennstoffzelle.

Prinzipiell unterscheidet man Röhren- und Plattenbauweisen mit zahlreichen Detailvariationen. Nach dem genwärtigen Stand des Wissens erlauben Zellen in Plattenbauweise einen höheren Wirkungsgrad, und deshalb werden

nur diese zur Zeit im Forschungszentrum Jülich untersucht. Die derzeit verwendete Geometrie ist in Abb. 1.5 zu sehen. Der Sauerstoff wird über den Luftkanal zugeführt, Wasserstoff durch den Gaskanal.

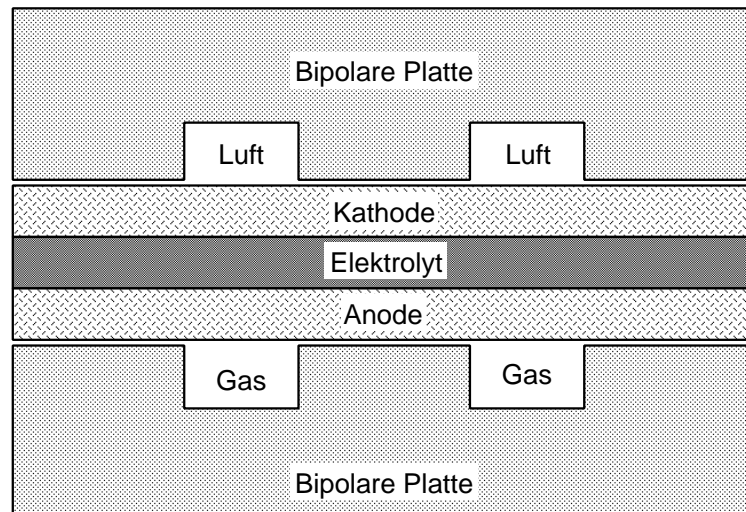


Abbildung 1.5: Die Brennstoffzelle in Plattenbauweise

Die Kanäle können dabei in Kreuzstrom- oder Gleichstromführung angeordnet sein, Brenngas und Luft gleich oder entgegengesetzt gerichtet sein. Der Zellstapel besteht real aus 10 bis 50 solcher Zellen übereinander, wobei in jeder Zelle ungefähr 20 Kanäle für Luft und Brennstoff vorhanden sind.

Die Ausmaße einer solchen Zelle sind im Zentimeterbereich, die Kanäle im Millimeter- und die Dicke des Elektrolyten und der Elektroden im Mikrometerbereich.

Die bipolare Platte muß mechanisch stabil, gasdicht und elektronenleitend sowie bei Betriebstemperaturen von ca. 1000°C beständig sein. Gut geeignet sind Keramiken oder Edelmetalle.

Für die Kathode sind diese Materialien ebenfalls gut geeignet, nur in poröser Struktur. Die Anode wird derzeit aus einer Metall-Keramik-Mischung hergestellt. Der Elektrolyt muß gasdicht und durchlässig für Sauerstoffionen sein. Derzeit wird Yttrium-stabilisiertes Zirkoniumoxid (ZrO_2)

verwendet. Wegen der schlechten Leitfähigkeit des Elektrolyten muß dieser extrem dünn gehalten werden.

Kapitel 2

Scientific Computing

Die hier angestrebte Modellierung zeichnet sich durch eine hohe Interdisziplinarität aus. Dies ist keine ausschließliche Besonderheit dieses Projektes, sondern die generelle Entwicklung, daß sich Algorithmen immer mehr dem speziellen Problem anpassen müssen, um eine hohe Effizienz zu erreichen. Dieses hat dazu geführt, daß sich in den letzten Jahren eine eigenständige Disziplin, das Scientific Computing, entwickelt hat.

Dieser Wissenschaftszweig soll nun kurz beschrieben werden. Das Scientific Computing ist eine interdisziplinäre Wissenschaft, die auf der Grundlage der Informatik und der Mathematik die Simulation einer Anwendung, z.B. der Physik, der Biologie und der Chemie, aber auch Wissenschaften wie der Meteorologie und Geologie, beschreibt.

Insbesondere die industrielle Anwendung dieser Disziplinen führt zu einer großen Palette von Anwendungen des Scientific Computing. Einerseits ist es eine kostengünstige Alternative zum Bau teurer Prototypen; andererseits können oder müssen Simulationen das Experiment völlig ersetzen, wie z.B. bei der Untersuchung des zukünftigen Weltklimas. Solche rechenzeitintensiven Problemstellungen wie sie wegen ihrer hohen Auflösung oder großen Komplexität auch bei anderen sogenannten Grand Challenges, wie z.B. der Analyse des menschlichen Genoms, vorkommen, sind die Herausforderung die an das Scientific Computing gestellt werden. Neben diesen Hoffnungen, die das Scientific Computing für die Zukunft erweckt, liegt seine Bedeutung aber vor allem in der Modellierung und Optimierung alltäglicher Probleme. Hier ist ein breites Spektrum von der Berechnung des Auftriebs eines Flugzeugflügels, der Crash Test Simulation oder auch der Schadstoffausbreitung in

Boden und Grundwasser. Durch Simulationen kann vielfach die Qualität eines Produktes entscheidend verbessert werden, wobei die Qualität sich nicht nur in der Lebensdauer ausdrückt, sondern gerade auch in anderen Aspekten, wie Erhöhung der Wirtschaftlichkeit oder der Verringerung der Umweltbelastung zu sehen ist.

In der Öffentlichkeit wurde vor allem die rasante Entwicklung der Rechner, insbesondere die Entwicklung der Parallelrechner, als Grundstein für die Lösung immer größerer Probleme gesehen. Abb. 2.1 zeigt diese Entwicklung¹.

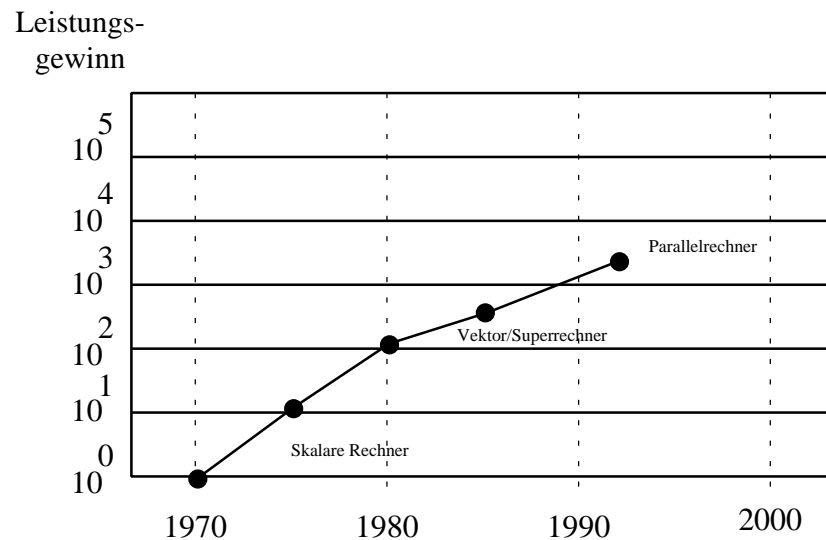


Abbildung 2.1: Entwicklung der Hardware

Deutlich weniger spektakulär, aber von nicht geringerer Bedeutung ist der Fortschritt, der durch verbesserte mathematische Methoden erzielt worden ist, wie in Abb. 2.2 zu sehen ist. Die wachsende Effizienz der Verfahren liegt nicht zuletzt darin begründet, daß das Scientific Computing nicht ein zufälliges Nebeneinander von Mathematik, Informatik und Anwendung ist, sondern durch die Interdisziplinarität die entwickelten Verfahren deutlich besser den

¹Quelle: US National Science Foundation – High Performance Computing and Networking

Problemen angepaßt werden und dies die Grundlage für eine erhebliche Effizienzsteigerung ist.

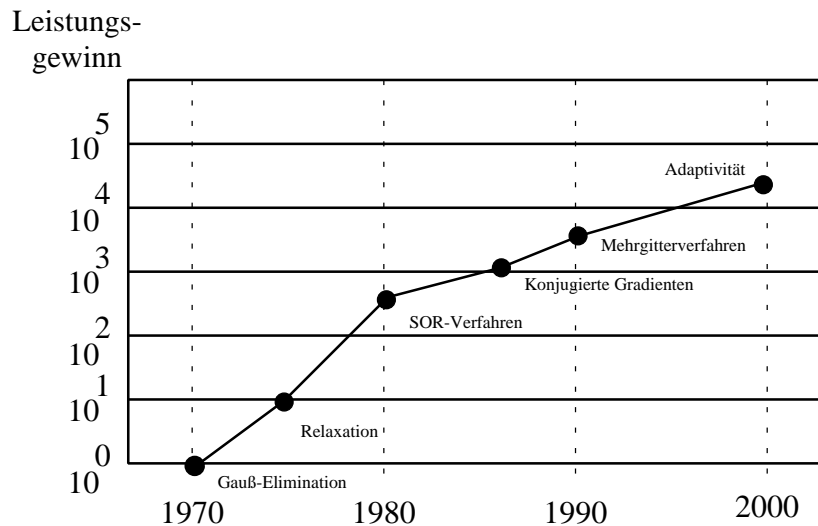


Abbildung 2.2: Entwicklung der mathematischen Verfahren zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen anhand eines Modellproblems

Ein typisches Beispiel sind hier die Mehrgitterverfahren, welche wesentlich mehr Wissen zur Lösung des Problems benötigen als klassische Verfahren.

All das bisher gesagte ordnet die Modellierung der Brennstoffzelle als ein Beispiel des Scientific Computing ein, wie aus Abb. 2.3 ersichtlich ist.

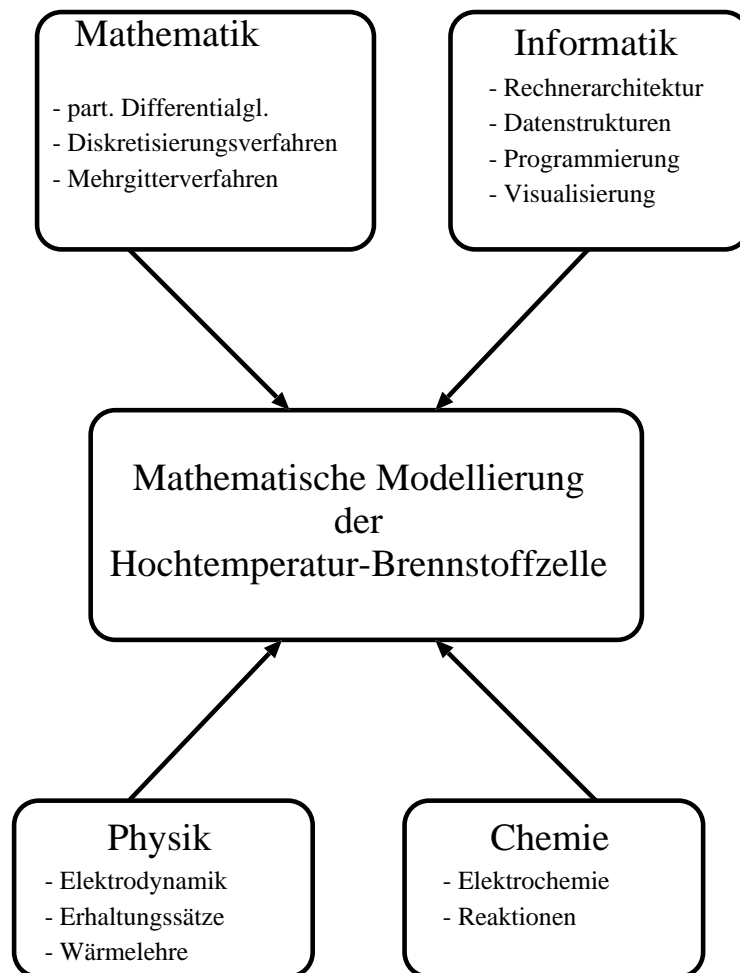


Abbildung 2.3: Modellierung der Brennstoffzelle als Beispiel für das Scientific Computing

Kapitel 3

Physikalische Beschreibung

In diesem Kapitel sollen die Gleichungen hergeleitet werden, die das Problem physikalisch beschreiben.

Zum einen sind dies die Erhaltungssätze für die Flußgrößen, zum anderen andere analytisch beschriebene Zusammenhänge sowie Randbedingungen. Auf die kontinuierliche Beschreibung der Erhaltungssätze, partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung, wird hier nicht näher eingegangen, da sie zwar das Problem klassifizieren, z.B. ob das System elliptisch ist oder nicht, aber hier nicht weiter benötigt werden. Im wesentlichen ist die Poisson-Gleichung mit Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen zu lösen.

Alle auftretenden physikalischen Größen sind in Tab. 3.1 aufgeführt.

3.1 Erhaltungssätze

Die mathematische Formulierung des Problems beruht auf den Erhaltungssätzen für Masse, Ladung und thermische Energie. Für jede dieser 3 Größen gilt, daß auf jedem beliebigen Kontrollvolumen V der Fluß F_n durch den Rand nach außen gleich dem Integral über die in V enthaltenen Quellen Q ist. Formal:

$$(3.1) \quad \oint_{\partial V} F_n d\sigma = \int \int \int_V Q dv$$

Betrachtet man nun den Übergang $|V| \rightarrow 0$, so geht obige Gleichung in die Poisson-Gleichung über. Die Flüsse sind an skalare Größen gebunden.

- Strom:

Reaktionsloses Gebiet: Ohmsches Gesetz

$$(3.2) \quad \Delta U := U(x) - U(y) = \int_x^y \rho I ds$$

An den elektrochemisch reagierenden Oberflächen wird der Spannungssprung beschrieben durch das Nernst-Potential, verringert um Polarisations- und ohmsche Verluste.

- Temperatur:

Feste Materialien (Diffusion):

$$(3.3) \quad T(x) - T(y) = \int_x^y W^D / \sigma ds$$

Im Gas (Konvektion):

$$(3.4) \quad W^K = T \cdot \varepsilon \cdot v$$

- Massen:

Für jede Gaskomponente gilt:

Diffusion:

$$(3.5) \quad p_{Gas}(x) \varrho_{Gas}(x) - p_{Gas}(y) \varrho_{Gas}(y) = \int_x^y F_{Gas}^D / \kappa_{Gas} ds$$

Konvektion:

$$(3.6) \quad F_{Gas}^K = p_{Gas} \cdot \varrho_{Gas} \cdot v$$

Quellen der jeweiligen Flüsse sind

- Strom: Keine

- Temperatur:

- ohmsche Verluste $Q_\Omega = \iiint \rho I^2 dV = \Delta U \cdot I$

- chem. Reaktionen: $Q_{Chem} = (\Delta U - \Delta U_T) \cdot I$

- Massen: Quellen und Senken ergeben sich aus den Reaktionen und sind direkt proportional zum Stromfluß

$$Q_{Gas} = c_0 I .$$

Zeichen	Bedeutung	Einheit
U	Spannung	V
ΔU_T	thermoneutrales Potential	V
ΔU_Ω	Ohmsche Potentialverluste	V
U_{Nernst}	Nernstspannung	V
I	Stromstärke	A
ρ	spez. Längenwiderstand	Ω/cm
$\hat{\rho}$	Widerstand	Ω
β	Elektronendurchtrittswiderstand	Ω
η	Polarisation	V
W^D	diffusiver Wärme flu ß	$J/(sec \cdot cm^2)$
W^K	konvektiver Wärme flu ß	$J/(sec \cdot cm^2)$
W	gesamter Wärme flu ß	$J/(sec \cdot cm^2)$
T	absolute Temperatur	K
σ	Leitfähigkeit	$J/(K \cdot cm \cdot sec)$
ε	spezifische Wärme	$J/(cm^3 \cdot K)$
F_{Gas}^K	konvektiver Massen flu ß	$g/(cm^2 \cdot sec)$
F_{Gas}^D	diffusiver Massen flu ß	$g/(cm^2 \cdot sec)$
p_{Gas}	Partialdruck einer Gaskomponente	bar
κ_{Gas}	Diffusionskoeffizient	cm^2/sec
ϱ_{Gas}	spezifische Dichte	$g/(cm^3 \cdot bar)$
v	Geschwindigkeit	cm/sec
Q_Ω	Ohmsche Verluste (Wärmequellen)	J/sec
Q_{Chem}	Wärme aus der chem. Reaktion	J/sec
Q_{Gas}	Massenquellen aus der chem. Reaktion	g/sec

Tabelle 3.1: Physikalische Größen

3.2 Randbedingungen und weitere Gleichungen

Randbedingungen:

- Temperatur: Die Umgebungstemperatur und Einströmtemperatur des Gases und der Luft werden vorgegeben. Am Rand ist die Zelle isoliert (kein Fluß nach außen), evtl. entstehen Wärmeverluste am Anfang und Ende der Zelle.
- Spannung: Vorgegeben wird eine konstante Spannung Δu_0 zwischen der oberen und unteren bipolaren Platte.

An der Grenzfläche zur Elektrode ist der Stromverlauf stetig, doch durch die chemische Reaktion findet hier der Spannungssprung statt.

An der Grenzschicht Kathode–Elektrolyt ergibt sich der in Abb. 3.1 dargestellte Zusammenhang. Hierbei ist der Spannungsverlauf über der Höhe der Zelle aufgetragen.

Es gilt:

$$(3.7) \quad U_{Nernst} - \Delta U_{\Omega_1} - \Delta U_{\Omega_2} - \eta = U_{Kathode} - U_{Elektrolyt} ,$$

sowie

$$(3.8) \quad \Delta U = U_{Nernst} - \eta .$$

ΔU gibt somit den Spannungssprung an, der ohne ohmsche Verluste erzielt werden könnte.

Die ohmschen Verluste werden gemäß $\Delta U_{\Omega_1} + \Delta U_{\Omega_2} = I \cdot \hat{\rho}$ berechnet. Somit ist im folgenden nur die Summe der Verluste von Elektrode und Elektrolyt bekannt, aber auch nur diese wird im folgenden benötigt. $\hat{\rho}$ ergibt sich aus der Serienschaltung von Widerständen. Die Polarisierung ist ebenfalls an den Stromfluß gekoppelt. Diese Beziehung wird derzeit approximiert durch

$$(3.9) \quad \begin{aligned} I = & c_1 \cdot p_{Gas} \cdot \eta / T + c_2 \cdot p_{Gas} \cdot \eta \\ & + c_3 \cdot p_{Gas} \cdot \eta \cdot T + c_4 \cdot p_{Gas} \cdot \eta^2 / T , \end{aligned}$$

wobei die Konstanten mit entsprechenden Einheiten zu verstehen sind. Insbesondere fließt bei $\eta = 0$ kein Strom.

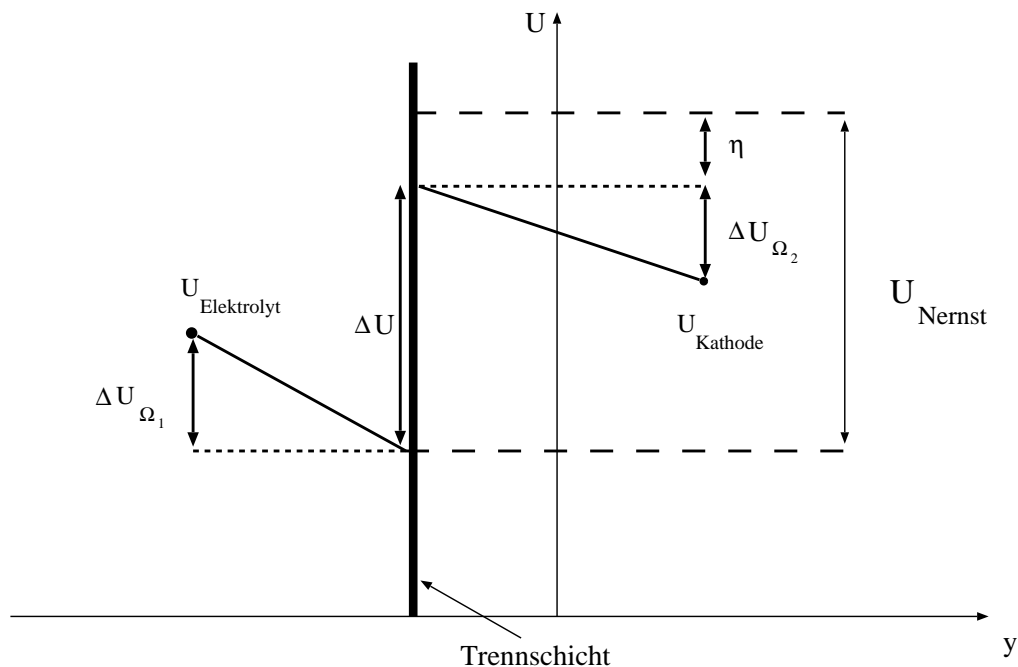


Abbildung 3.1: Spannung U in Abhängigkeit von der Zellhöhe y an der Grenzschicht Kathode-Elektrolyt

Es ist zwar nur die Summe der Ohmschen Verluste $\Delta U_{\Omega_1} + \Delta U_{\Omega_2}$ bekannt, aber nur diese spielt im weiteren Verlauf eine Rolle.

Da die Gleichung (3.9) nichtlinear in η ist, ist eine äußere Iteration notwendig.

Für die gesamte Zelle ergaben experimentelle Versuche nur geringe Druckschwankungen, so daß im folgenden isobar mit $p_{\text{Gesamt}} = 1$ gerechnet wird.

3.3 Diskretisierung der Gleichungen

In diesem Abschnitt werden die Gleichungen aus dem vorhergehenden Kapitel diskretisiert und hieraus die zu lösenden Gleichungssysteme aufgestellt.

Als Diskretisierung der Gleichung wird die FIT-Methode (Finite Integration Technique) verwendet. Diese beruht auf einem dualen Gitter und ist an einem Beispiel in Abb. 3.2 dargestellt.

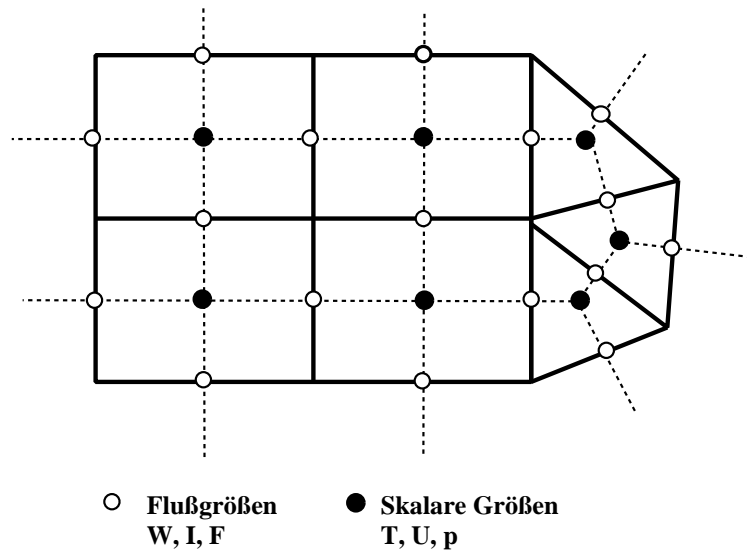


Abbildung 3.2: Diskretisierung mit Hilfe eines dualen Gitters

Das Gebiet wird in Zellen zerlegt, die aus Quadern und Prismen bestehen können.

Die Werte der skalaren Größen Temperatur, Potential und Konzentrationen werden auf dem Zellmittelpunkt berechnet, die Flußgrößen – mathematisch die ersten Ableitungen – auf dem Mittelpunkt der gemeinsamen Oberfläche zweier Zellen. Flußgrößen sind Wärme-, Strom- und Massenfluß.

Die zweiten Ableitungen, die Quellstärke, ist wiederum auf dem Zellmittelpunkt definiert. Durch die skalaren Bindungen wird schließlich ein Gleichungssystem für die skalaren Größen aufgestellt und diese berechnet. Implizit stehen jedoch auch alle Flußgrößen zur Verfügung.

Die Integrale werden wie folgt diskretisiert. Das Volumenintegral wird angenähert durch eine Einpunktformel gemäß einem Punkt im Volumenkörper

multipliziert mit dem Volumen, d. h.

$$\iiint_V Q dV \approx |V|Q(x_i) \quad \text{mit } x_i \in V.$$

Oberflächenintegrale werden berechnet als Summe der Integrale über die Teiloberflächen, wobei diese die Seiten des Prismas bzw. des Quaders bezeichnen. Diese Integrale werden wiederum mit Einpunktformeln approximiert als Produkt eines Funktionswertes auf der Oberfläche und des Ausmasses der Oberfläche, also

$$\oint_{\partial V_i} F_n dO \approx \sum_{j=1}^k A_{n_j,i} F_{n_j,i}(x_j) \quad \text{mit } x_j \in A_{n_j,i}.$$

Hierbei bezeichne $A_{n_j,i}$ die gemeinsame Fläche der Zelle i mit dem j -ten Nachbarn und $F_{n_j,i}$ den Fluß vom Mittelpunkt der betrachteten Zelle zum Mittelpunkt der j -ten Nachbarzelle. k ist die Anzahl der Nachbarzellen: beim Prisma 5, beim Quader 6.

Analog hierzu bezeichne im folgenden der Index n_j bei den skalaren Größen den Wert des j -ten Nachbarn von Zelle i und bei Flußgrößen den Fluß von Zelle i zum Nachbarn n_j .

Die skalaren Bindungen, durch die Linienintegrale (3.2), (3.4) und (3.5) beschrieben, werden ebenfalls durch Einpunktformeln angenähert:

$$\int_{x_1}^{x_2} c(x) ds \approx c(x^*) \cdot \|x_2 - x_1\| \quad \text{mit } x^* \in \overline{x_1 x_2}.$$

Zur Übersichtlichkeit wird nun n_j statt $n_{j,i}$ verwendet.

3.3.1 Stromfluß

Für das Linienintegral (3.2) zwischen den Zellmittelpunkten P_{n_j} und P_i ergibt sich

$$(3.10) \quad U_{n_j} - U_i \approx l_j \cdot \rho_{n_j} \cdot I_{n_j}$$

l_j ist der Abstand der Zellmittelpunkte $\|P_{n_j} - P_i\|$. Somit ist

$$I_{n_j} \approx \frac{U_{n_j} - U_i}{l_j \cdot \rho_{n_j}}$$

und

$$(3.11) \quad \sum_{j=1}^k A_{n_j} \frac{U_{n_j} - U_i}{l_j \cdot \rho_{n_j}} \approx |V_i| Q_i = 0 .$$

An den Grenzbereichen zu denjenigen Nachbarzellen, an denen die Elektrochemie stattfindet, ist ein Spannungssprung zu modellieren. Dort wird (3.10) modifiziert zu

$$(3.12) \quad U_{n_j} - U_i \approx l_j \cdot \rho_{n_j} \cdot I_{n_j} + \Delta U(I_{n_j}) .$$

Für die Berechnung wird ΔU durch Taylor-Entwicklung gemäß $\Delta U(I_{n_j}) := \Delta U(\bar{I}_{n_j}) + \beta \cdot (I_{n_j} - \bar{I}_{n_j})$ linearisiert.

\bar{I}_{n_j} bezeichne hier eine Approximation des Stromflusses, der aus den U -Werten der vorhergehenden Iteration gewonnen wird. Hieraus kann wiederum mit (3.9) $\Delta U(\bar{I}_{n_j}) := U_{Nernst} - \eta(\bar{I}_{n_j})$ und $\beta = \frac{\partial \eta}{\partial I}(\bar{I}_{n_j})$ berechnet werden.

Die Gleichung für den Strom geht über in

$$I_{n_j} \approx \frac{U_{n_j} - U_i - \Delta U(\bar{I}_{n_j}) + \beta \bar{I}_{n_j}}{l_j \cdot \rho_{n_j} + \beta} ,$$

und dieses geht als Stromfluß in die Summierung ein.

3.3.2 Wärmefluß

Für den diffusiven Anteil des Wärmetransports gilt analog zum Stromfluß

$$(3.13) \quad W_{n_j}^D \approx \frac{T_{n_j} - T_i}{l_j} \cdot \sigma_{n_j} .$$

Mathematisch etwas schwieriger zu handhaben ist der konvektive Fluß

$$(3.14) \quad W_{n_j}^K \approx T_{n_j}^* \varepsilon_{n_j} v_{n_j} ,$$

wobei die Problematik in der geeigneten Berechnung der Mittelung $T_{n_j}^*$ liegt.

Hier bezeichnet v die Flußgeschwindigkeit und ε_{n_j} die spezifische Wärme.

Es ergibt sich insgesamt für die Wärmebilanz

$$\sum_{j=1}^k A_{n_j} W_{n_j} = \sum_{j=1}^k A_{n_j} (W_{n_j}^D - W_{n_j}^K) = |V_i| Q_i .$$

Das negative Vorzeichen ist notwendig, da Flüsse in die Zelle hinein summiert werden, v aber dem entgegengerichtet ist.

Der Wert von T^* ist auf dem Zellrand zu bestimmen und somit muß geeignet gemittelt werden. Das einfache arithmetische Mittel erweist sich hier als instabil, insbesondere kann das Problem seine Elliptizität verlieren. Deswegen wird folgender aus der Elektrolyse bewährter Ansatz [22] verwendet:

$$(3.15) \quad T^* = \mu T_{n_j} + (1 - \mu) T_i$$

mit

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\frac{-\xi v_{n_j}}{1 + \xi |v_{n_j}|} + 1 \right)$$

wobei ξ wiederum über

$$\xi = \frac{\varepsilon_{n_j} l_j}{2 \cdot \sigma_{n_j}}$$

berechnet wird und das Verhältnis zwischen konvektiver und diffusiver Strömung beschreibt. Dies liefert im Falle geringer Konvektion ($\varepsilon_{n_j} \rightarrow 0$) lineare Interpolation, bei großer Konvektion ($\varepsilon_{n_j} \rightarrow \infty$) wird der Einfluß der Nachbarzelle vernachlässigbar. Bei sehr hohen Geschwindigkeiten wird nur die Temperatur betrachtet, von der der Fluß kommt, also bei Einströmung die Nachbarzelle, bei Ausströmung die aktuelle Zelle.

Es ergibt sich für den Wärmefluß

$$W_{n_j} \approx T_{n_j} \left(\frac{\sigma_{n_j}}{l_j} - v_{n_j} \varepsilon_{n_j} \mu \right) - T_i \left(\frac{\sigma_{n_j}}{l_j} - v_{n_j} \varepsilon_{n_j} \mu + v_{n_j} \varepsilon_{n_j} \right) .$$

3.3.3 Massenfluß

Die Behandlung der Massenflüsse kann völlig analog zu den Wärmeflüssen behandelt werden.

Die Massenflüsse sind die konvektiven Flüsse in den Kanälen und die diffusiven in den Elektroden. Die Diffusion im Elektrolyten braucht nicht berechnet zu werden, da diese direkt aus dem Stromfluß ermittelt werden kann.

Die Diffusion wird analog zu (3.13) beschrieben durch

$$(3.16) \quad F_{n_j, Gas}^D \approx \frac{p_{Gas, n_j} \cdot \varrho_{Gas, n_j} - p_{Gas, i} \cdot \varrho_{Gas, i}}{l_j} \cdot \kappa_{n_j} ,$$

und der konvektive Fluß aus

$$(3.17) \quad F_{n_j, Gas}^K \approx p_{Gas, n_j}^* \varrho_{n_j} v ,$$

wobei p_{Gas, n_j}^* eine geeignete Mittelung analog zur Temperatur in (3.15) und v die Geschwindigkeit in Strömungsrichtung bezeichne.

Es ergibt sich insgesamt für die Massenflußbilanz für jede Gaskomponente

$$\sum_{j=1}^k A_{n_j} F_{n_j, Gas} = \sum_{j=1}^k A_{n_j} (F_{n_j, Gas}^D - F_{n_j, Gas}^K) = |V_i| Q_i = c_0 I.$$

Die Massenflüsse sind an Strom und Wärme gekoppelt, da die berechneten Konzentrationen die Reaktionen beeinflussen.

3.4 Gültigkeitsbereich der Gleichungen

Wie im vorhergehenden gezeigt existieren sechs verschiedene Gleichungen, die in unterschiedlichen Bereichen aktiv sind.

1. Stromfluß
 - (a) reaktionsloses Gebiet
 - (b) Spannungssprung
2. Wärmefluß
 - (a) Diffusion
 - (b) Konvektion
3. Massenfluß
 - (a) Diffusion
 - (b) Konvektion

Die Bereiche und die dort gültigen Gleichungen sind

- | | |
|------------------------------|---------------------------|
| 1. Bipolare Platte | 1. (a) und 2. (a) |
| 2. Gaskanäle | 2. (b) und 3. (b) |
| 3. Elektroden und Elektrolyt | 1. (b), 2. (a) und 3. (a) |

Kapitel 4

Gittererzeugung

In diesem Kapitel wird beschrieben, welche Hilfsmittel im Rahmen des Projektes erarbeitet wurden, um die Geometrie geeignet zu beschreiben und im nächsten Schritt zu diskretisieren. Weiterhin wird erläutert, wie dieses Gitter verfeinert wird und wieviel Speicher für das Mehrgitterverfahren zu allokalieren ist.

4.1 Allgemeines

Sowohl Geometriedefinition als auch Diskretisierung werden im Rahmen der Modellierung benötigt. Einerseits soll eine eingegebene Geometrie oder Zerlegung visualisiert werden, andererseits dient diese Visualisierung nur der Überprüfung und ist nicht das Endprodukt der Verarbeitungskette. Es muß somit zusätzlich eine numerische Datei zur Weiterverarbeitung erzeugt werden. Im Rahmen dieses Projektes wurde daher das koordinatenbasierte Visualisierungsprogramm GEOM implementiert, welches für die Verarbeitungsschritte Geometrieingabe, Diskretisierung und Visualisierung der verschiedenen im Lösungsverfahren verwendeten Gitter bzw. lokaler Gitterverfeinerungen als Visualisierung dient.

Während GEOM zur Geometriedefinition den vollständigen Funktionalitätsumfang besitzt, dient es bei der Diskretisierung lediglich zur Plausibilitätsüberprüfung einer Zerlegung. Die Diskretisierung selber ist ein aufwendiges numerisches Problem. Sie kann anhand dieses Programmes direkt eingegeben werden, jedoch empfiehlt es sich bei komplizierten Geometrien

oder bei vorgegebenen Optimalitätskriterien Hilfsmittel zur automatischen Netzgenerierung zur Verfügung zu stellen.

Hierzu wurden einerseits verschiedene Zerlegungsprogramme portiert und die Schnittstellen eingerichtet. Da jedoch keines dieser Programme die gestellten Anforderungen vollständig erfüllt, wird derzeit auch auf diesem Gebiet an einer eigenen Implementierung gearbeitet.

4.2 Geometrieeingabe

Zunächst muß die Geometrie der Zelle beschrieben werden.

Dies geschieht mit dem im Rahmen dieses Projektes erstellten Geometriebeschreibungsprogramm GEOM, das graphische Primitivbefehle in einen Postscript-Previewer umwandelt und einen Eingabedatensatz zur Weiterverarbeitung – sprich Diskretisierung – erstellt.

Mögliche Elemente zur Geometriedefinition sind Kreise, Ellipsen, Splines und Polygonzüge. Weiterhin wird an dieser Stelle auch das Gebiet, die Weltkoordinaten, festgelegt. Die einzelnen Objekte, wie Elektroden, Platten, Kanäle, lassen sich modular abspeichern und dann skaliert und verschoben zusammenbinden. Weiterhin sind dort auch die Verwendung von Variablen als Koordinaten, sowie arithmetische Operationen auf diesen Variablen erlaubt.

Das Ziel einer koordinatenbasierten modularen Geometriebeschreibung findet sich in ähnlicher Weise in dem im Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM) der KFA implementierten Graphiksystem XGraf [14].

Das Programm GEOM verwendet deshalb im Wesentlichen die Notationen von XGraf, jedoch sind einige Funktionen hier nicht installiert bzw. andere Funktionen wie Splines und Ellipsen nur in GEOM implementiert.

4.3 Diskretisierung der Geometrie

Sind die globalen Konturen und die Materialkonturen erstellt, so ist eine effiziente Zerlegung der Zelle durchzuführen. Zunächst wird die Zelle in Flußrichtung, der z -Richtung, in Scheiben zerlegt, so daß anschließend eine Zerlegung in der $x - y$ -Richtung durchzuführen ist. Diese zweidimensionale Zerlegung wird einmal durchgeführt und ist für alle Scheiben gültig.

Dort wird das Gebiet zerlegt durch Dreiecke und Rechtecke, so daß als dreidimensionale Volumen Prismen und Quader entstehen.

Für das Mehrgitterverfahren muß das Gitter auf der größten Ebene vorgegeben werden, die anderen Gitter werden dann automatisch, mit der Option der Benutzersteuerung, erzeugt. Das grobe Gitter kann manuell eingegeben werden, es kann aber auch mit einigen hierzu erstellten Programmen erzeugt werden.

Zur Zerlegung werden derzeit folgende Möglichkeiten angeboten:

- GEOMPACK [19] zur Delaunay – Triangulierung
- ACM 624 – ACM-Routinen zur Triangulierung
- kartesische Gitter

Aus später noch erläuterten Gründen müssen alle Dreiecke möglichst die Bedingung erfüllen, keine stumpfen Winkel zu haben. In neueren Veröffentlichungen [4] scheint dieses Problem zumindest theoretisch gelöst zu sein, jedoch liefern die von den Autoren mitgelieferten Programme schon bei recht einfachen Geometrien nur unzureichende Ergebnisse. Andere Systeme, wie z.B. [3] erzielen meist eine gute Triangulierung, daß heißt wenige stumpfe Winkel oder nur wenig größer als 90° . Dies ist zunächst noch unbefriedigend, so daß an eigenen Lösungen gearbeitet wird. Jedoch kann dieses Modul auch später weiter verbessert oder ausgetauscht werden, ohne das dies den Fortgang der anderen Arbeiten, insbesondere dem eigentlichen Rechenprogramm, einschränkt.

4.4 Gitterverfeinerung

Wie in Kap. 3.3 näher erläutert wird, wird hier mit einem dualen Gitter gearbeitet. Zu jedem Volumen, im folgenden auch als Gitterzelle bezeichnet, existiert ein Zellmittelpunkt, auf dem skalare Größen berechnet werden. Auf einem Punkt der Schnittfläche zweier benachbarter Volumen werden die Flußgrößen definiert.

Ein wichtiges Kriterium zur Anwendung der hier verwendeten Finite Integration Technique ist, daß die Zellmittelpunkte, deren Verbindungslinien

senkrecht zu den Randflächen stehen müssen, innerhalb des Kontrollvolumens liegen. Die Zellmittelpunkte ergeben sich aus dem Schnittpunkt der Mittelsenkrechten. Dieser Punkt liegt beim Rechteck immer innerhalb, beim Dreieck nur, falls es keine stumpfen Winkel enthält.

Es muß sichergestellt werden, daß dieser Schnittpunkt auf jedem Gitter innerhalb der Zelle liegt. Bei der Verfeinerung, wie sie hier angewandt wird, braucht dieses nur auf dem größten Gitter gewährleistet werden, da die Dreiecke bzw. Rechtecke auf allen Verfeinerungsstufen ähnlich zu denen auf dem größten Gitter sind.

Die Verfeinerung beruht darauf, alle Seitenmittelpunkte der Grobgitterzelle zu verbinden und so vier neue Zellen zu erhalten. Diese Verfeinerung, wie in Abb. 4.1 und 4.2 dargestellt, führt dazu, daß bei Dreiecken drei, bei Vierecken vier neue Punkte hinzukommen.

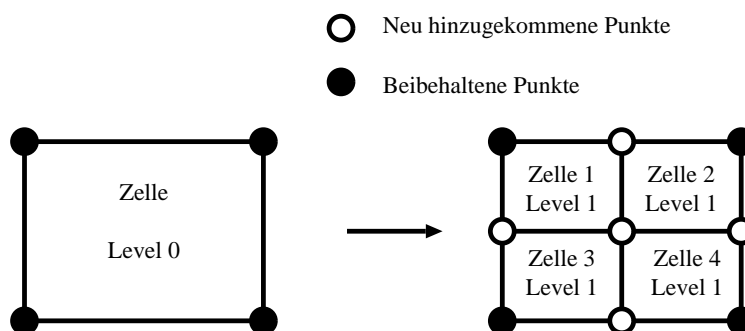


Abbildung 4.1: Verfeinerung einer Viereckszelle

Ein allgemeinerer Fall, bei dem ein Gebiet mit beiden Arten von Zellen überdeckt ist, ist in Abb. 4.3 gezeigt.

4.5 Speicherbedarf

Es ist die Frage zu beantworten, wieviele Gitter zu einem gegebenen groben Gitter auf einem Rechner angelegt werden können. Die Speicherung der Gitter besteht aus den Punkten P und Zellen C . Weiterhin gegeben ist die

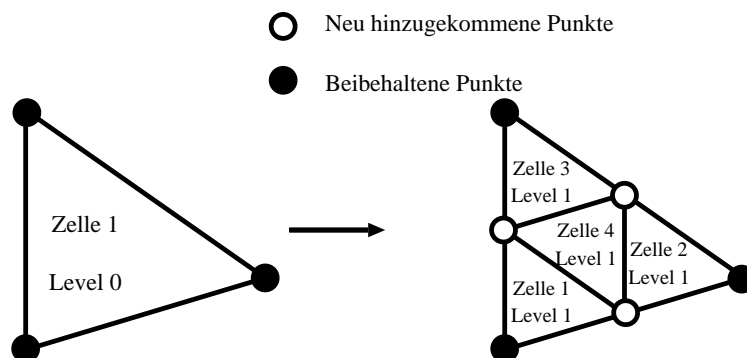


Abbildung 4.2: Verfeinerung einer Dreieckszelle

Anzahl Außenpunkte bzw. Außenkanten A , da jeder Punkt die Information trägt, ob er Randpunkt oder innerer Punkt ist.

Bei einer gegebenen Verteilung auf dem grobem Gitter von Punkten P_0 und Zellen C_0 , die aus Vierecken und Dreiecken besteht, ergeben sich die zu allozierenden Speicherbereiche für ein Mehrgitterverfahren mit k Gittern aus diesen Größen. Auf der n -ten Gitterverfeinerung bezeichne P_n die Anzahl der Punkte, die dort benötigt werden und C_n die Zellen. Ein hochgestelltes Viereck bzw. Dreieck sei die Anzahl nur für die Zellen des jeweiligen Typs.

Die Berechnung vereinfacht sich unter Zuhilfenahme der Größe I_n , die Anzahl der Innenkanten, welche jedoch im Lauf der Rechnung eliminiert wird.

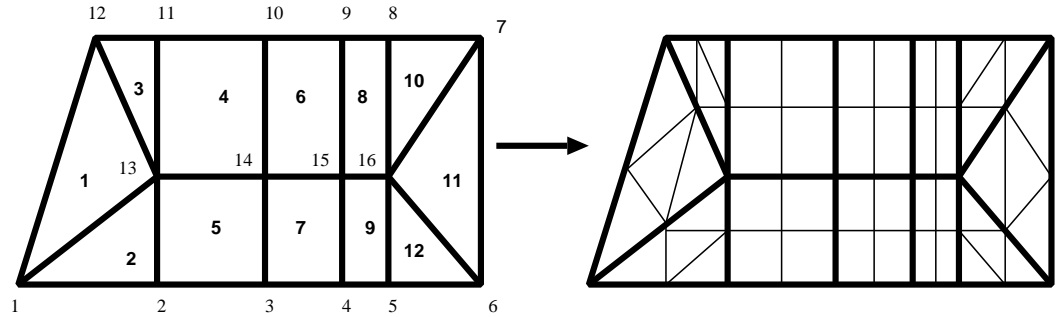
Bei einer Gitterverfeinerung, bei der in der Zelle die Seitenmittelpunkte verbunden werden, gilt

$$(4.1) \quad C_{n+1} = 4 \cdot C_n .$$

Für die Außenkanten gilt wegen der Halbierung

$$(4.2) \quad A_{n+1} = 2 \cdot A_n .$$

Die Anzahl der Innenkanten in einer Zerlegung erhält man, in dem man alle Kanten aller Zellen addiert, die Aussenkanten subtrahiert und das Resultat halbiert, da nun jede Kante zweimal gezählt worden ist.



Punkte: 16
 Zellen : 12
 Dreiecke: 6
 Vierecke: 6
 Außenkanten: 12

Punkte: 49
 Zellen : 48
 Dreiecke: 24
 Vierecke: 24
 Außenkanten: 24

Abbildung 4.3: Gitterverfeinerung beim gemischten Gitter

Für die Gesamtzahl Innenkanten $I_n = I_n^\Delta + I_n^\square$ gilt somit

$$I_n = \frac{1}{2}(3C_n^\Delta + 4C_n^\square - A_n) .$$

Die Anzahl der Punkte auf dem nächsten Gitter ergibt sich als Summe der Punkte auf dem vorhergehenden Gitter, jeweils einem zusätzlichen Punkt auf jeder Kante, sowie den Zellmittelpunkten der Viereckszellen, also

$$\begin{aligned}
 (4.3) \quad P_{n+1} &= P_n + A_n + I_n + C_n^\square \\
 &= P_n + \frac{1}{2}A_n + \frac{1}{2}(3C_n^\Delta + 4C_n^\square) + C_n^\square \\
 &= P_n + \frac{1}{2}A_n + \frac{3}{2}C_n^\Delta + 3C_n^\square ,
 \end{aligned}$$

wobei A_n und C_n sich aus den Anfangswerten A_0 und C_0 mit (4.1) und (4.2) zu $A_n = 2^n A_0$ und $C_n = 4^n C_0$ berechnen lassen.

Insbesondere ergeben sich die Gleichungen für reine Dreiecks- oder Rechtecksgitter als Spezialfall; am Beispiel in Abb. 4.3 läßt sich diese Gleichung verifizieren.

Kapitel 5

Mehrgitterverfahren

Der Wunsch nach immer exakteren Modellierungen in vertretbarer Rechenzeit stellt hohe Anforderungen an die Algorithmen.

Bei den Algorithmen zur numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen sind die Mehrgitterverfahren zumindest theoretisch optimal. Sie besitzen eine Komplexität $O(n)$, wobei n die Anzahl der Gitterpunkte auf dem feinsten Gitter bezeichne, d.h. die Lösung des diskreten Problems ist vom Aufwand her direkt proportional zur Anzahl der Unbekannten.

5.1 Einführung

Grundlegend für die Effizienz der Mehrgitterverfahren ist, daß es sich hierbei nicht um einen bestimmten Löser handelt, sondern die Mehrgitteridee eine Strategie zur Konstruktion eines Löses für ein bestimmtes Problem ist. Deshalb müssen die einzelnen Komponenten an das Problem angepaßt werden und somit das Wissen über die Differentialgleichung und das Gebiet in das Lösungsverfahren für das diskrete Problem einfließen.

Während klassische Iterationsverfahren, wie das Gauß-Seidel Verfahren, das SOR-Verfahren oder CG- und CG-ähnliche Verfahren auf einem zuvor erstellten Gitter das diskrete Problem lösen, verwenden die Mehrgitterverfahren verschiedene Diskretisierungsstufen. Die Idee ist, nur diejenigen Komponenten der Lösung auf feinen Diskretisierungsstufen zu berechnen, welche diese hohe Auflösung erfordern. Die glatten Komponenten, also diejenigen, die sich über das Gebiet nur geringfügig ändern, können auf deutlich

gröberen Gittern berechnet werden.

Historie

Die ersten Ansätze zu den Mehrgitterverfahren wurden von Federenko und Bachvalov bereits Mitte der 60-er Jahre gemacht. Sie entdeckten die Komplexität $O(n)$, jedoch war die zugehörige Proportionalitätskonstante so groß, daß diese Entdeckung ohne praktische Bedeutung blieb. Achi Brandt beschreibt in seinen Artikeln 1973 und 1977 als erster den Algorithmus detaillierter und gilt somit als Begründer der Mehrgitterverfahren. Während seine Arbeiten sich mit der praktischen Seite befassen, werden 1978 von Wolfgang Hackbusch ebenfalls die Mehrgitterverfahren, ohne die Arbeit Brandts zu kennen, hergeleitet. Diese Arbeiten gehen die Verfahren von einer theoretischen Seite an. Seit Mitte der 80-er Jahre zeigt sich der Durchbruch dieser Verfahren in einer Reihe von Veröffentlichungen, Tutorien, Konferenzbeiträgen und Büchern.

5.2 Idee der Mehrgitterverfahren

Das entscheidende Problem des Rechenaufwandes klassischer Verfahren ist, daß eine Halbierung der Schrittweite in den drei Raumdimensionen zur Verachtfachung der Anzahl der Unbekannten führt. Die Komplexität der Lösung des linearen Gleichungssystems hängt ebenfalls von dieser Anzahl ab. Beispielsweise ist die Gauß-Elimination von der Ordnung n^3 , d.h. der Aufwand wächst um einen Faktor 256.

Diesen *Fluch der Dimension* machen die Mehrgitterverfahren zu ihrem Vorteil. Auf dem feinsten Gitter werden nur einige Operationen durchgeführt und dann zum nächst gröberen Gitter übergegangen, auf welchem die Lösung mit deutlich weniger Aufwand, eben wegen der Umkehrung des Fluchs der Dimension, bestimmt werden kann. Da jedoch in der Regel auch hier der Aufwand noch zu groß ist, wird diese Idee sukzessive angewandt, d.h. auf diesem Gitter werden wiederum nur einige Schritte durchgeführt und auf das nächst gröbere Gitter übergegangen. Dieser Prozeß wird solange fortgeführt, bis man auf einem Gitter angelangt ist, dessen Lösung mit sehr geringem Aufwand berechnet werden kann. Im Idealfall besteht dieses Gitter aus einem einzigen Punkt, in komplizierteren Geometrien aus der Anzahl von Punkten, die die

Geometrie und Physik hinreichend genau beschreiben. Dieses Gleichungssystem auf dem gröbsten Gitter wird gelöst und dann werden wiederum die Lösungen sukzessive auf die feineren Gitter übertragen und an diese Gitter angepaßt.

Somit ist die grundlegende Vorgehensweise beschrieben, die im folgenden formalisiert wird.

5.3 Notation und Definitionen

Das elliptische lineare kontinuierliche Randwertproblem ist gegeben durch

$$(5.1) \quad L U = f \text{ im Innern } (\Omega) \quad \text{und}$$

$$(5.2) \quad B U = g \text{ auf dem Rand } (\Gamma)$$

Die diskreten Gleichungen erhalten einen formalen Index h , der sich auf die Gittergröße bezieht. Das diskrete Problem ist gegeben durch

$$(5.3) \quad L^h U^h = f^h \text{ im Innern } (\Omega_h) \quad \text{und}$$

$$(5.4) \quad B^h U^h = g^h \text{ auf dem Rand } (\Gamma_h)$$

Im folgenden bezeichnen Großbuchstaben U, U^h, V^h, \dots die exakten Lösungen des Problems und Kleinbuchstaben u, u^h, v^h, \dots Näherungslösungen.

Der Rand wird hier nicht weiter betrachtet, sondern es wird vorausgesetzt, daß er eliminiert und in die Differentialgleichung eingesetzt werden kann. Somit ist auf einem Gitter Ω_h nur $L^h U^h = f^h$ zu lösen. Wegen der Linearität des Problems wird der Differentialoperator L^h durch die ihn beschreibende Koeffizientenmatrix A^h ersetzt.

Der **Fehler zu einem Gitter h** ist gegeben durch

$$e^h := U^h - u^h$$

und das **Residuum** durch

$$r^h := f^h - A^h u^h .$$

5.4 Grobgitterkorrektur

Grundlage der Korrektur der Lösung durch gröbere Gitter ist der Zusammenhang zwischen der Lösung des Gleichungssystems $A^h u^h = f^h$ und dem Fehler e^h , denn es gilt:

$$(5.5) \quad A^h e^h = A^h (U^h - u^h) = f^h - A^h u^h = r^h .$$

Diese Gleichung wird als **Residuumsleichung** (engl. defect equation) bezeichnet. Wird die Residuumsleichung gelöst bzw. eine Näherungslösung \bar{e}^h für e^h bestimmt, so kann die iterierte u^h durch $u^h := u^h + \bar{e}^h$ verbessert werden.

Zwar entspricht der Aufwand zur Lösung der Residuumsleichung dem Aufwand zur Lösung des ursprünglichen Systems, doch hat diese den Vorteil, daß nur Korrekturen ausgerechnet werden, und diese werden zwischen den Gittern transferiert.

Ist eine Näherungslösung u^h auf einem feinen Gitter h gegeben, so wird das Residuum r^h berechnet, dieses auf das grobe Gitter H transportiert (**restringiert**), näherungsweise dort die Residuumsleichung $A^H e^H = r^H$ gelöst und die so berechnete Korrektur wieder auf das feine Gitter übertragen (**prolongiert**). Der Algorithmus der Grobgitterkorrektur (**Coarse Grid Correction**) ist in Abb. 5.1 dargestellt. Der Operator I_h^H bezeichne die Restraining vom Feingitter h auf das Grobgitter H und I_H^h die Prolongation von H auf h .

Diese Vorgehensweise definiert bereits ein Iterationsverfahren, jedoch ist die Konvergenz schlecht, oder das Verfahren divergiert. Um zu verstehen, warum dies der Fall ist, ist eine Analyse über die Fourier-Entwicklung des Fehlers notwendig. Der Fehler ist darstellbar gemäß

$$(5.6) \quad e^h = \sum_k \alpha_k \Phi_k^h$$

mit $\Phi_k^h = \sin(\frac{j \cdot k \pi}{N})$ für $j = 1, \dots, N$ und $N = 1/h$. Φ_k wird auch als k -ter Fourier-Mode bezeichnet. Abb. 5.2 zeigt, daß bei niederfrequenten Moden der Funktionsverlauf bereits auf dem groben Gitter ahnbar ist, d.h. anhand der Punkte auf dem groben Gitter läßt sich eine gute Approximation der Fourier-Moden rekonstruieren, während dies bei hochfrequenten Moden nicht der Fall ist. Im Zusammenhang mit der Grobgitterkorrektur bedeutet dies, daß

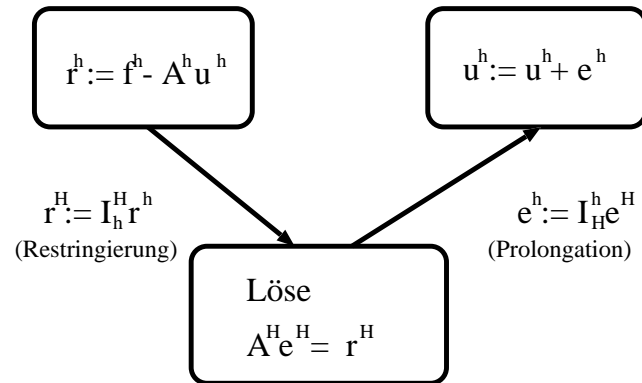


Abbildung 5.1: Die Grobgitterkorrektur

der niederfrequente Anteil des Fehlers sehr gut korrigiert wird, hochfrequente Anteile jedoch für das grobe Gitter nicht sichtbar sind und somit diese Anteile durch die Grobgitterkorrektur nicht oder nur schlecht eliminiert werden.

Die Grobgitterkorrektur ist als Iterationsverfahren somit kein leistungsfähiges Verfahren.

5.5 Glättung

Die geeignete Ergänzung zur Behandlung der hochfrequenten Fehleranteile findet sich in den klassischen Iterationsverfahren, wie dem Gauß-Seidel-Verfahren oder dem SOR-Verfahren. Um das Verhalten dieser Verfahren zu analysieren sei im folgenden der Einfluß des Gauß-Seidel-Verfahrens auf den Fehler für die Laplace Gleichung im Einheitsquadrat mit zufälligem Startfehler in Abb. 5.4 gezeigt. Randbedingung ist $g(x, y) = 0$ und als Diskretisierung ein 5-Punkt-Laplace-Stern auf einem quadratischen Gitter mit 40×40 Gitterpunkten verwendet. Wie dort zu sehen ist, werden die hochfrequenten Anteile des Fehlers schnell geglättet. Wie jedoch dort und in Abb. 5.3 zu sehen ist, wird der Fehler dann nur langsam reduziert.

Hierin ist auch die Ineffizienz dieser Verfahren begründet. Da derartige Verfahren den Fehler schnell glätten, heißen sie Relaxationsverfahren.

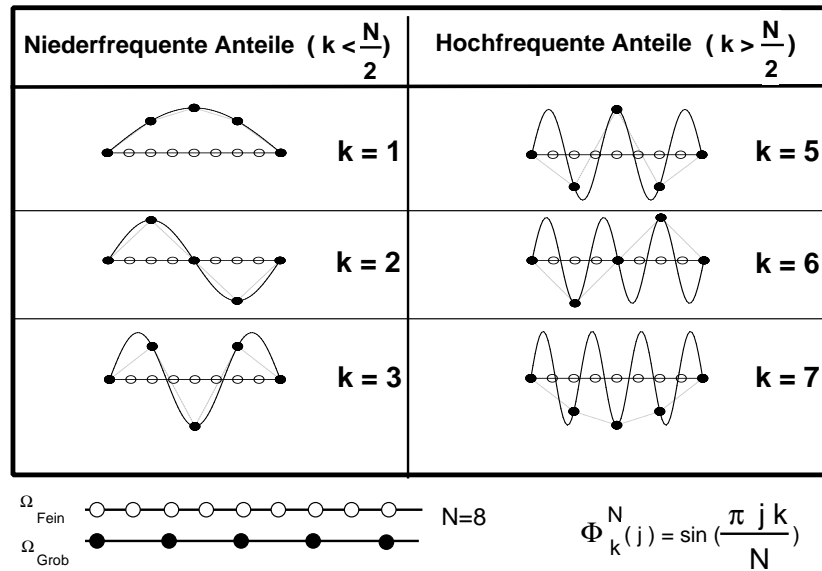


Abbildung 5.2: Für grobe und feine Gitter sichtbare Fourier-Moden

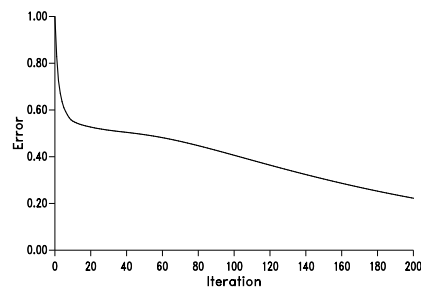


Abbildung 5.3: Verlauf des Fehlers

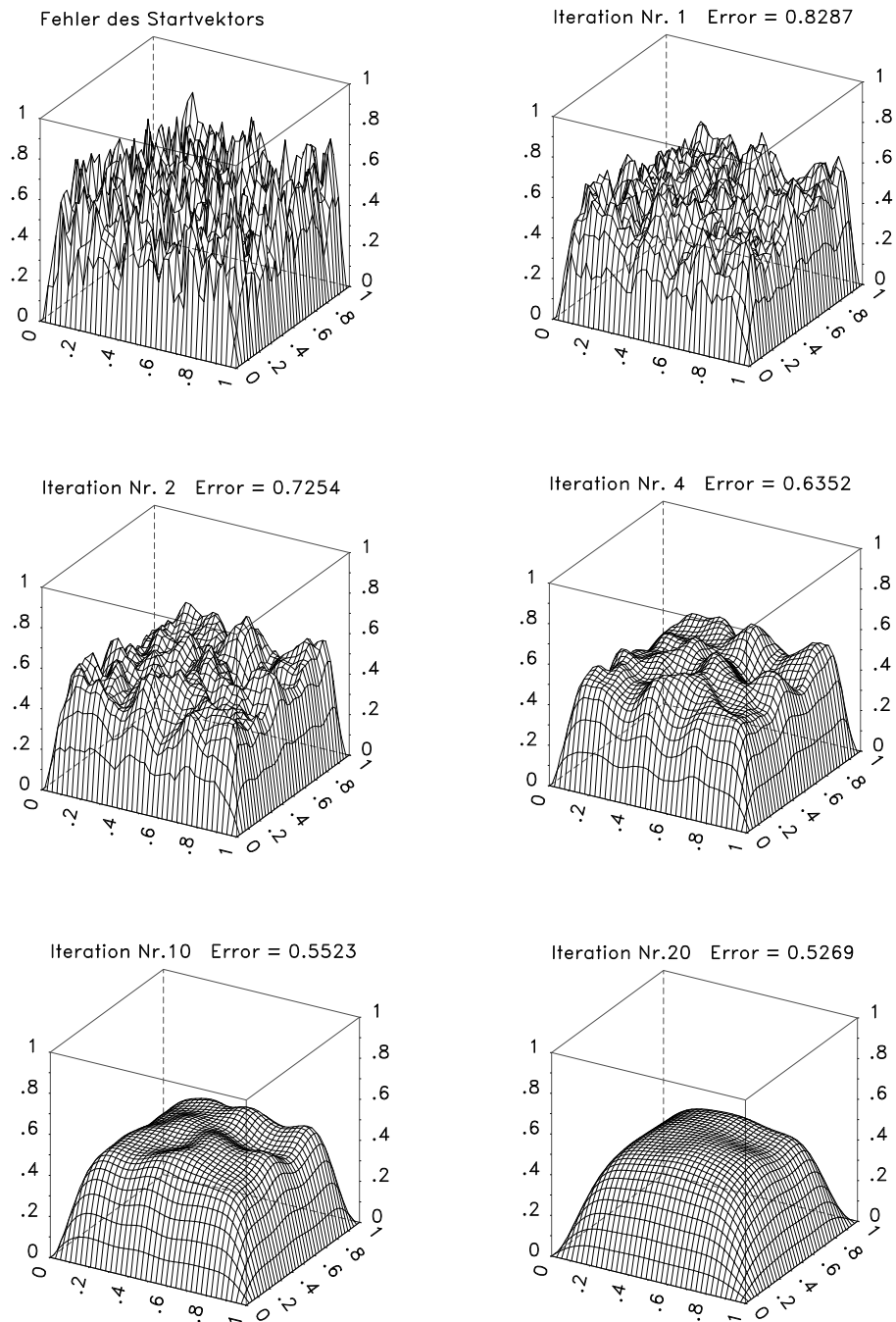


Abbildung 5.4: Reduktion des Fehlers durch das Gauß-Seidel-Verfahren für die Laplace-Gleichung auf dem Einheitsquadrat

5.6 Der V-Cycle

Die Lösung liegt nun offensichtlich in der Kombination von Grobgitterkorrektur und Relaxationsverfahren.

Zunächst werden auf dem feinen Gitter durch einige Glättungsschritte die hochfrequenten Fehleranteile eliminiert, dann durch einen Grobgitterkorrekturschritt die niederfrequenten Anteile. Die Glättung (**smoothing**) wird nach der Korrektur noch einmal auf dem feinen Gitter durchgeführt, um bei der Prolongation entstandene hochfrequente Fehleranteile zu eliminieren. Dabei wird die Anzahl dieser **Post-Smoothing** Schritte kleiner sein als die **Pre-Smoothing** Schritte, die einen höheren Einfluß haben. Für beide Glättungen wird jedoch die Anzahl Schritte moderat gewählt werden, da hier nicht die Konvergenz des Verfahrens wichtig ist, sondern nur die Glättung der hochfrequenten Fehleranteile. Bemerkt sei hier noch, daß die Konvergenz der Relaxationsverfahren hier nicht gebraucht wird und somit als Glätter auch nicht-konvergente Verfahren in Frage kommen.

Das Resultat ist nun ein sehr einfacher Mehrgitter-Algorithmus (2-Gitter Zyklus):

1. Glätte die bisherige Lösung u^h ν_1 mal (Pre-Smoothing)
2. Führe Grobgitterkorrektur durch
3. Glätte die aktualisierte Lösung u^h ν_2 mal (Post-Smoothing)

Dieser Algorithmus ist jedoch ohne praktische Bedeutung, da die Lösung der Residuumsleichung auf dem groben Gitter immer noch zu teuer ist. Der Ausweg liegt in der rekursiven Struktur. Zur Lösung dieser Gleichung kann wiederum das Mehrgitter-Verfahren verwendet werden.

Somit wird die Lösung des Gleichungssystems sukzessive bis auf das gröbste Gitter verlagert. Dort wird es gelöst und die Korrekturen mit den jeweiligen Post-Smoothing Schritten wieder bis zum feinsten Gitter übertragen.

Der Algorithmus wird wegen seiner Gestalt **V-Zyklus** genannt und ist in Abb. 5.5 dargestellt.

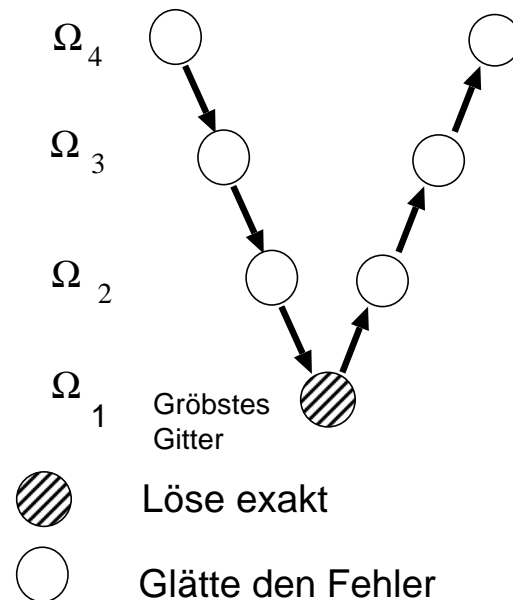


Abbildung 5.5: V-Zyklus

5.7 Full Multigrid

Unbeantwortet geblieben ist die Frage nach dem Startvektor, also der Approximation der Lösung auf dem feinsten Gitter zu Beginn des Algorithmus. Die Konvergenz des Verfahrens hängt eng mit der geeigneten Wahl dieses Vektors zusammen.

Auch hier kommt der rekursive Charakter der Mehrgitterverfahren zum tragen. Es wird vor dem V-Zyklus ein V-Zyklus auf dem nächst größeren Gitter durchgeführt und das Ergebnis dann prolongiert, wobei bei dieser Prolongation eine hohe Ordnung erzielt werden muß. Insbesondere ist der hier verwendete Prolongationsoperator in der Regel nicht derselbe wie der Operator im V-Zyklus. Als Startwert für den V-Zyklus auf dem größeren Gitter wird wiederum ein V-Zyklus auf dem nächst größeren Gitter durchgeführt, usw. bis das größte Gitter erreicht ist, auf welchem das Problem wiederum exakt gelöst wird. Es ist also nicht erforderlich, einen Startvektor für das Verfahren vorzugeben.

Das Resultat ist der in dieser Arbeit verwendete Full Multigrid Zyklus (FMG), der in Abb. 5.6 dargestellt ist.

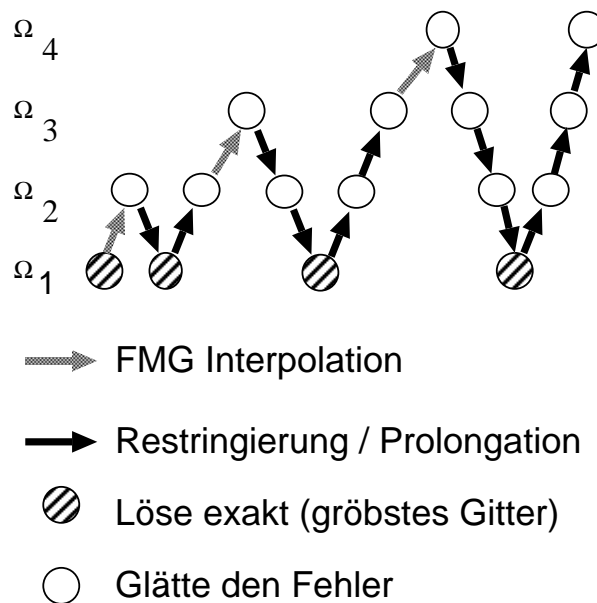


Abbildung 5.6: Full Multigrid

5.8 Restringierung und Prolongation

Die Frage, die hier beantwortet werden soll, ist, wie der Gittertransfer geeignet durchgeführt werden kann.

Restringierung

Die Restringierung muß das Feingitterresiduum auf das grobe Gitter abbilden. Die häufigst angewandte Technik ist das **full weighting**, welches in Stencil-Notation für den 2d-Fall auf einem kartesischen Gitter folgendes Aussehen hat

$$I_h^{2h} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} .$$

Häufig werden problemangepaßt andere Restringierungen vorgenommen. So ist die einfachste Restringierung das **straight injection**, was voraussetzt, daß sich das Residuum lokal nicht wesentlich ändert, wobei folgender Stencil angewandt wird

$$I_h^{2h} = \frac{1}{16} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Dies bedeutet, daß die Grobgitterpunkte ihren Wert vom feinen Gitter übernehmen und die Werte der Feingitterpunkte, die keine Grobgitterpunkte sind, vernachlässigt werden. Für die in dieser Arbeit ebenfalls interessierenden Triangulierungen wird häufig ein 7-Punkt Operator verwendet, wie er in natürlicher Weise bei einer Triangulierung auf einem zugrundeliegenden quadratischen Gitter entsteht

$$I_h^{2h} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Prolongation

Als Prolongation, also die Übertragung des Fehlers auf die feinen Gitter, wird häufig eine lineare Interpolation in allen Dimensionen vorgenommen, also für 2 Dimensionen

$$I_{2h}^h = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

oder im Fall der gleichmässigen Triangulierung

$$I_{2h}^h = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Alle Stencils lassen sich ohne Schwierigkeiten auch auf 3 Dimensionen erweitern.

Die geeignete Wahl dieser Operatoren ist ebenfalls von entscheidender Bedeutung für die Effizienz des Mehrgitterverfahrens.

Kapitel 6

Stand der Arbeiten und Ausblick

Alle Vorarbeiten zum Lösungsverfahren sind abgeschlossen. Die Geometrie kann mit dem im Rahmen dieses Projektes erstellten Programmsystems GEOM beschrieben werden und anschließend mit einigen, zum Teil aus Bibliotheken, zum Teil selbst implementierten Diskretisierungsprogrammen zerlegt werden.

Die diskreten Gleichungen sind für im Prinzip beliebige polyedrische Volumina hergeleitet. Wie die nichtlinearen Kopplungen zu behandeln sind, werden Konvergenzanalysen im weiteren Verlauf zeigen.

Das eigentliche Lösungsverfahren ist bereits im fortgeschrittenen Stadium. Gittererzeuger für verschiedene Gitterlevel, lokale Gitterverfeinerungen, geometrische Funktionen und Plausibilitätsüberprüfungen sind implementiert. Die Matrixassemblierung und eine geeignete Anpassung der Mehrgitterkomponenten Relaxation, Prolongation und Restriktion an das Problem werden derzeit durchgeführt und getestet.

Wegen der Problematik der nichtlinearen Kopplungen, komplizierter Geometrie und Erhaltung der Elliptizität der Gleichungen erscheint auch die Möglichkeit einer aufwendigen Grobgitterlösung in Betracht gezogen werden zu müssen. Deshalb wurden Matrizen der hier auftretenden Grobgitterbesetzungsstruktur anhand iterativer Verfahren – CG-Verfahren mit unterschiedlichen Vorkonditionierungen – untersucht. In wieweit diese zum Einsatz kommen wird der weitere Verlauf des Projektes zeigen.

Zu den wesentlichen wissenschaftlichen Ergebnissen zählt insbesondere die für das Lösungsverfahren zulässige Diskretisierung des Gitters, welche

sicherstellt, daß zu jeder erzeugten Gitterzelle sowohl der Umkreis existiert, als auch dessen Mittelpunkt innerhalb der Gitterzelle liegt.

Im weiteren Verlauf wird zunächst das Mehrgitterverfahren abgeschlossen und hierzu Tests zu einer geeigneten Wahl der Mehrgitterkomponenten und Behandlung der nichtlinearen Kopplungen durchgeführt. Schließlich sollen umfangreiche Tests zu verschiedenen Geometrien, Materialien, Brenngaszusammensetzungen, sowie Rand- und Anfangswerten durchgeführt werden.

Letzlich ist vorgesehen, das Programm auf zeitabhängige Prozesse, insbesondere zur Analyse von Lastspitzen, zu erweitern.

Literaturverzeichnis

- [1] A. J. APPLEBY, F. R. FOULKES *Fuel Cell Handbook*, van Nostrand Reinhold, New York, 18 (1989)
- [2] N. S. BACHVALOV *On the Convergence of a Relaxation Method with natural Constraints on the Elliptic Operator*, USSR Comput. Math. and Math. Phys. 6,5 (1966)
- [3] R. BANK *PLTMG: A Software Package for Solving Elliptic Partial Differential Equations (Users Guide)*, Frontiers in Applied Mathematics, SIAM, Philadelphia (1990)
- [4] M. BERN, D. EPPSTEIN *Polynomial-size nonobtuse Triangulation of Polygons*, Int. J. Comp. Geom. and Appl. 2 (1992)
- [5] A. BRANDT ET. AL. *Multigrid Course*, Arbeitspapiere der GMD Nr. 690 (1992)
- [6] A. BRANDT *Multi-level Adaptive Technique (MLAT) for Fast Numerical Solution to Boundary Value Problems*, Lecture Notes in Physics, 18, Springer (1973)
- [7] A. BRANDT *Multi-level Adaptive Solutions to Boundary-value Problems* Math. Computing (1977)
- [8] W. BRIGGS *A Multigrid Tutorial*, SIAM, Philadelphia (1987)
- [9] P. DEUFLHARD, A. HOHMANN *Numerische Mathematik*, de Gruyter (1991)

- [10] J. DIVISEK, M. J. SCHWUGER *Brennstoffzellen als Wandler chemischer Energie in Elektrizität*, Jahresbericht des Forschungszentrums Jülich GmbH (1990)
- [11] R. P. FEDORENKO *The Speed of Convergence of an Iterative Process*, Ussr Comput. Math. and Math. Phys. 4,3 (1964)
- [12] W. GAJEWSKI ET. AL. *Brennstoffzellen*, Spektrum der Wissenschaft 7/1995 (1995)
- [13] G.H. GOLUB, CH.F. VAN LOAN *Matrix Computations*, 2. Auflage, John Hopkins University Press (1989)
- [14] W. GÜRICH, CH. SCHELTHOFF, G. BERK *Das Grafiksystem XGraf*, Forschungszentrum Jülich, Zentralinstitut für Angewandte Mathematik, Benutzerhandbuch KFA-ZAM-BHB-0119 (1994)
- [15] W. HACKBUSCH *On the Multigrid Method applied to Difference Equations*, Computing 20 (1978)
- [16] W. HACKBUSCH, U. TROTTEBERG (ED.) *Multigrid Methods*, Lecture Notes in Mathematics 960, Springer (1981)
- [17] W. HACKBUSCH *Multigrid Methods and Applications*, Springer Series in Comp. Math. 4, Springer (1985)
- [18] W. HACKBUSCH *Iterative Solution of Large Sparse Systems of Equations*, Springer (1994)
- [19] B. JOE *GEOMPACK - A Software Package for the Generation of Meshes Using Geometric Algorithms*, Adv. Eng. Software, Vol.13 No. 5/6 (1991)
- [20] S. MCCORMICK ET. AL. *Multigrid Methods*, Frontiers in Applied Mathematics, Vol. 5, SIAM, Philadelphia (1987)
- [21] B. STEFFEN *Mathematical Methods for High Resolution Modelling of SOFC*, Proceedings of the 5th IEA Workshop on SOFC, Forschungszentrum Jülich (1993)

- [22] B. STEFFEN *Calculation of Potential Heat Distribution in a Bipolar Electrolyser*, Proceedings of the 2nd IEA Workshop on Hydrogen Production, Forschungszentrum Jülich (1991)
- [23] J. STOER *Numerische Mathematik I*, 2. Auflage, Springer (1976)
- [24] J. STOER, R. BULIRSCH *Numerische Mathematik II*, 2. Auflage, Springer (1976)
- [25] P. WESSELING *An Introduction to Multigrid Methods*, Pure and Applied Mathematics Series, John Wiley and Sons (1992)
- [26] G. WITTUM *Mehrgitterverfahren*, Spektrum der Wissenschaft 4/1990 (1990)
- [27] D. YOUNG *A Historical Overview of Iterative Methods*, Computer Physics Communications, 53:1-17 (1989)